

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации

**Аннотация рабочей программы дисциплины
Б1.В.16 Основы компьютерного моделирования в органической химии**

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	Синтез и анализ органических соединений
Форма обучения:	очная

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенция(и), индикатор(ы) и результаты обучения

ПК-ПЗ Способен планировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации

ПК-ПЗ.3 Способен осуществлять направленный синтез органических соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи

Знать:

ПК-ПЗ.3/Зн3 Знать принципы построения моделей в хемоинформатике

ПК-ПЗ.3/Зн4 Знать основные программные продукты для молекулярного моделирования

ПК-ПЗ.3/Зн5 Знать основные методы молекулярного моделирования

Уметь:

ПК-ПЗ.3/Ум2 Уметь выполнять прогнозирование свойств органических соединений

ПК-ПЗ.3/Ум3 Уметь выполнять виртуальный скрининг биологической активности

ПК-ПЗ.3/Ум4 Уметь решать типовые задачи молекулярного моделирования

Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.В.16 «Основы компьютерного моделирования в органической химии» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 8.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.14 Методы органического синтеза;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.14 Методы органического синтеза;

Б3.01(Д) Подготовка к защите и защита выпускной квалификационной работы;

Б2.В.01.02(Пд) производственная практика, преддипломная практика;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

Содержание разделов, тем дисциплины

Раздел 1. Основы хемоинформатики.

Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования.

Представление химической информации в компьютерной среде. Химические базы данных, организация структурного поиска. Статистические методы моделирования. Обучение работы с химическими редакторами и основными базами химических данных. Перевод химической информации из графической формы в текстовую и наоборот.

Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений.

Прогнозирование свойств органических соединений. Поиск количественных соотношений структура-активность (QSAR). Использование баз данных и статистических моделей для прогнозирования свойств соединений на примере предсказания спектров ЯМР и виртуального скрининга биологической активности. Решение индивидуальных задач.

Использование статистических моделей для нахождения количественной взаимосвязи структура-активность (QSAR). Решение индивидуальной задачи.

Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг.

Использование статистических моделей для нахождения количественной взаимосвязи структура-активность (QSAR). Решение индивидуальной задачи.

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.

Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия.

Термины и понятия молекулярного моделирования (ММ). Классификация методов ММ. Программные продукты для ММ. Молекулярная динамика, принцип и области применения, конформационный анализ. Анализ и обсуждение методов молекулярного моделирования. Анализ принципов решения задач по оптимизации геометрии молекул и расчету их зарядовых характеристик. Решение индивидуальных задач.

Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования.

Квантовохимические методы ММ. Уравнение Шредингера и теория молекулярных орбиталей. Уровни теории: методы Хюккеля, полуэмпирические методы, методы abinitio. Метод Хартри-Фока. Базисные наборы орбиталей. Теория возмущений Меллера-Плессета, теория функционала плотности. Анализ принципов решения задач молекулярного моделирования по сканированию ППЭ и оценки устойчивости таутомеров и конформеров. Решение индивидуальных задач.

Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования.

Типовые задачи ММ. Оптимизация молекулы, расчет нормальный колебаний и термодинамических параметров. Поиск переходного состояния. Сканирование поверхности потенциальной энергии. Расчет спектров ИК и ЯМР. Анализ принципов расчета спектров ИК, УФ и ЯМР методами молекулярного моделирования. Решение индивидуальных задач.

Тема 2.4. Молекулярный докинг.

Анализ ключевых принципов молекулярного докинга. Проведение тестирования.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Очная форма обучения

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Практические занятия (часы)	Лекции (часы)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Восьмой семестр	108	3	62	28	14	20	40	Зачет (6)
Всего	108	3	62	28	14	20	40	6

Разработчик(и)

Кафедра органической химии, кандидат химических наук, доцент Чернов Н. М.